

Diss. ETH No. 12030

**ON THE NUMERICAL SOLUTION OF THE COMPRESSIBLE
NAVIER-STOKES EQUATIONS FOR REACTING AND
NON-REACTING GAS MIXTURES**

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
DOCTOR OF TECHNICAL SCIENCES

presented by

PATRICK JENNY

Dipl. Inf.-Ing. ETH
born December 19, 1965
citizen of Switzerland

Accepted on the recommendation of
Dr. B. Müller, examiner
Prof. Dr. R. Jeltsch, co-examiner

January 1997

ABSTRACT

To study acoustic effects in premixed laminar flames the compressible Navier-Stokes equations with stiff source terms for the chemistry are numerically solved by a cell centered finite volume method. Three basic numerical problems are discussed which deal with gas mixtures, convergence acceleration for subsonic simulations and the computation of the inviscid fluxes at the volume interfaces taking the viscous terms, the source terms and 2D effects into account.

Conservative Euler solvers for gas mixtures produce numerical errors, if the temperature and the ratio of specific heats are not constant. For mixtures of calorically perfect gases, a simple correction of the total energy per unit volume is proposed to avoid these errors. This is done in a physical way and only the total energy loses some of its conservativity. Numerical simulations of contact discontinuity convection, a shock tube problem and shock-interface interactions in 1D and 2D yield much more accurate solutions, if the correction is applied. The straightforward extension to 3D is outlined.

As the ratio of the acoustic and entropy wave speeds is large for low Mach number flames, a lot of time steps are necessary with an explicit scheme to simulate a contact discontinuity crossing the computational domain. An easy way is shown how one can use much larger time steps with an explicit code to obtain the steady state solution. The method is based on the idea that the ratio of the acoustic and entropy wave speeds gets closer to one by subtracting a constant value from the pressure in the whole field. Only the inviscid terms of the energy equation are influenced by that pressure decrease. As long as compressibility effects remain small, the error remains small. Moreover, the error can be corrected by solving a scalar equation after each time step such that the steady state solution of the modified scheme is equal to the steady state of the non-modified scheme.

Applying a conventional Riemann solver for flame simulations and even for 2D

Euler simulations without source terms can lead to dramatic inaccuracies. A new approach for a flux solver is introduced, which takes viscous terms, source terms and 2D effects into account. The basic idea is to distribute the source terms, which also contain the viscous terms and 2D effects, to the corresponding volume interfaces. The price is a nonlinear algebraic system for six unknowns instead of a linear system for three unknowns to evaluate the fluxes. Simulations of premixed laminar flames in 1D and 2D and a 2D Euler simulation without source terms yield much more accurate results, if the new solver is applied. Unsteady simulations of two colliding flames producing sound show results which correspond almost precisely to the analytic solution. Thus, opposed to conventional Riemann solvers, our new flux solver is able to compute acoustic effects in flames accurately. Finally numerical results of acoustic interaction with a 2D Bunsen flame show a flattened flame shape which is at least qualitatively comparable with experimental measurements. The present approach for a flux solver is more general and can be applied to solve other systems of partial differential equations which contain inviscid terms, e.g. for the shallow water equations.

ZUSAMMENFASSUNG

Um akustische Effekte in Vormischflammen studieren zu können, werden die kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen mit steifem Quellterm für die Chemie numerisch mit Hilfe einer Zellenmittelpunkt Finite-Volumen-Methode gelöst. Drei grundlegende Probleme werden hier diskutiert. Beim ersten geht es um Gasgemische, beim zweiten um Konvergenzbeschleunigung bei Unterschallströmung und beim dritten um die Berechnung der reibungsfreien Flüsse an den Volumenseiten, wobei viskose Terme, Quellterme und mehrdimensionale Effekte miteinbezogen werden.

Konservative Euler Löser für Gasgemische produzieren numerische Fehler, falls sowohl die Temperatur als auch das Verhältnis der spezifischen Wärmen nicht konstant sind. Für Gemische von perfekten Gasen wird eine einfache Korrektur der Totalenergie pro Einheitsvolumen vorgeschlagen, um diese Fehler zu vermeiden. Die zugrunde liegende Idee ist physikalischer Natur, und einzig in der Energiegleichung muss ein kleiner Erhaltungsfehler in Kauf genommen werden. Numerische Simulationen von Kontaktunstetigkeiten, die mit der Strömung mitkonvektiert werden, eines Stossrohrproblems und von Wechselwirkungen zwischen einem Stoss und einer Trennungsfläche wurden in 1D und 2D durchgeführt und liefern viel genauere Resultate mit Korrektur als ohne. Die Erweiterung für 3D wird beschrieben.

Da das Verhältnis der Geschwindigkeiten von akustischen Wellen und der Strömungsgeschwindigkeit bei Verbrennung bei kleinen Machzahlen gross ist, sind für ein explizites Schema viele Zeitschritte nötig, bis eine Kontaktunstetigkeit das Rechengebiet durchquert hat. Es wird ein einfacher Weg gezeigt, wie mit einem expliziten Code grössere Zeitschritte verwendet werden können, um eine stationäre Lösung zu erhalten. Die Methode basiert auf der Idee, dass das Verhältnis der Geschwindigkeiten von akustischen Wellen und Strömungsgeschwin-

digkeit kleiner wird, falls man einen konstanten Wert vom Druckfeld subtrahiert. Nur die reibungsfreien Terme der Energiegleichung sind davon betroffen. Solange die Kompressibilitätseffekte klein bleiben, bleibt auch der Fehler klein. Dieser Fehler kann nun so korrigiert werden, dass die stationäre Lösung mit dem modifizierten Schema gleich derjenigen mit dem ursprünglichen ist, indem man nach jedem Zeitschritt eine skalare Korrekturgleichung löst.

Falls ein konventioneller Riemann Löser für Verbrennungssimulationen oder auch für mehrdimensionale Euler Rechnungen ohne Quellterme angewandt wird, können grosse Ungenauigkeiten auftreten. Ein neuer Ansatz für einen Flusslöser, der viskose Terme, Quellterme und mehrdimensionale Effekte einbezieht, wird vorgestellt. Die zugrunde liegende Idee ist, die Quellterme, die hier auch die viskosen Terme und die 2D Effekte beinhalten, vom Volumeninnern auf die Volumenseiten zu verteilen. Der Preis ist, dass ein nichtlineares Gleichungssystem für sechs Unbekannte an Stelle von drei linearen Gleichungen gelöst werden muss, um die Flüsse an der entsprechenden Volumenseite zu berechnen. Simulationen von laminaren Vormischflammen in 1D und 2D und eine 2D Euler Simulation ohne Quellterme liefern viel genauere Resultate mit dem neuen Löser. Ergebnisse instationärer Simulationen von Schallerzeugung zweier kollidierender Flammen entsprechen fast ganz genau der analytischen Lösung. Im Gegensatz zu konventionellen Riemann Lösern ist es also möglich, akustische Effekte in Flammen mit hoher Genauigkeit zu simulieren. Schliesslich wurde eine 2D Bunsenflamme mit Schall angeregt. Die abgeflachte Form der Flammenkontur entspricht zumindest qualitativ der von Experimenten. Der hier vorgestellte Ansatz für das Berechnen der reibungsfreien Flüsse kann auch zum Lösen anderer Systeme von partiellen Differentialgleichungen angewandt werden, z.B. um die Flachwassergleichungen zu lösen.